

بررسی خصوصیات فیزیکی و شیمیایی چهار مهارکننده ی تیروزیناز قارچی (Naringin, Chrisin,)

In Silico (Quercetin, Kaempferol) در محیط

دکتر علیرضا فراست

چکیده:

تیروزیناز، نوعی مونواکسیژناز گلیکوزیله، چند عملکردی و حاوی مس است که کاتالیز کننده ی دو مرحله ی اول ملانوزن در پستانداران بوده و به طور گسترده ای در میکروارگانیسیم ها، حیوانات و گیاهان توزیع شده است. فعالیت این آنزیم در پوست منجر به تولید مقادیر زیادی ملانین شده که این امر مسبب ایجاد انواعی از اختلالات درماتولوژیک اعم از: ملانوما، افزایش رنگدانه های پوستی^۱ و از بین رفتن رنگدانه در پوست^۲ می شود.

با توجه به کاربرد گسترده ی فرایند شبیه سازی در حوزه های مختلف علوم زیستی در مطالعه حاضر به بررسی خواص فیزیکی و شیمیایی چهار مهارکننده ی فلاونویدی تیروزیناز Chrisin, Naringin, Quercetin و Kaempferol در محیط *in silico* پرداخته شد.

ابتدا ساختار پروتئین تیروزیناز از پایگاه داده پروتئین^۳ با آدرس اینترنتی www.rcsb.org استخراج گردید. برای پروتئین مذکور (ID= 2y9w) مناسب ترین گزینه موجود بود. انجام داکینگ مولکولی فلاونویدهای نامبرده و سوبسترای L-DOPA (سوبسترای مرحله دوم فعالیت آنزیمی) در شیار آنزیم تیروزیناز انجام شد سپس کمپلکس حاصل از مرحله قبل با نرم افزار گرومکس شبیه سازی شد تا پارامترهای ساختاری و ترمودینامیکی آن تعیین گردد.

مطالعات حاصل نشان داد فلاونوئیدهای موجود با جایگاه فعال آنزیم آنزیم تیروزیناز واکنش میدهند و منجر به تغییرات ساختاری در آنزیم می گردند. در بین مهار کننده ای مذکور، نارینجین با انرژی اتصالی بهتر نسبت به سوبسترا به آنزیم متصل شده است و به عنوان کاندید مناسبی جهت مهار این آنزیم معرفی می گردد.

نتایج بدست آمده نشان داد که فلاونوئیدها می تواند موجب مهار آنزیم تیروزیناز گردیده و کاندیدای مناسبی برای درمان سرطان ملانوما هستند.

کلمات کلیدی: تیروزیناز، فلاونوئیدها، مهارکننده، سوبسترا

¹ Hyper pigmentation

² Depigmentation

³ Protein Data Bank: PDB

